Minería de datos y Patrones

Version 2025-1

Aprendizaje supervisado – SVM

[Capítulo 3]

Dr. José Ramón Iglesias
DSP-ASIC BUILDER GROUP
Director Semillero TRIAC
Ingenieria Electronica
Universidad Popular del Cesar

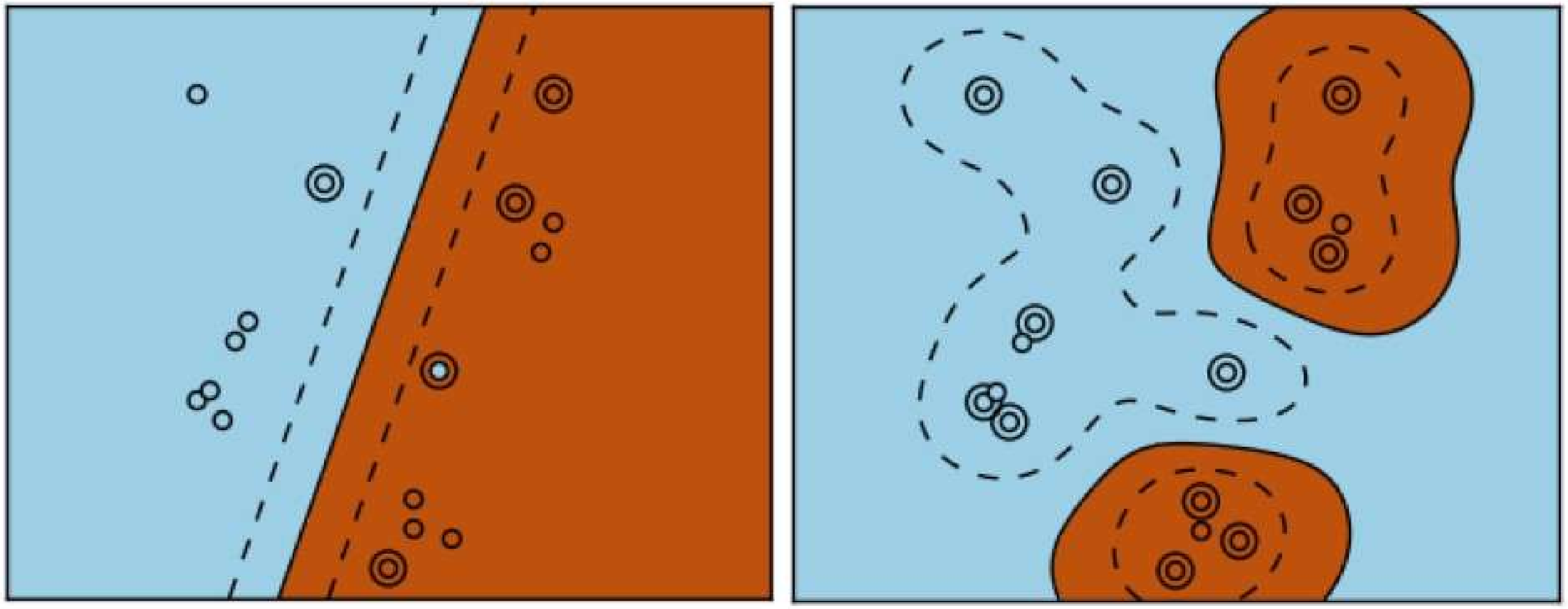
Aprendizaje supervisado – SVM

Outline : Máquinas de Vectores de Soporte

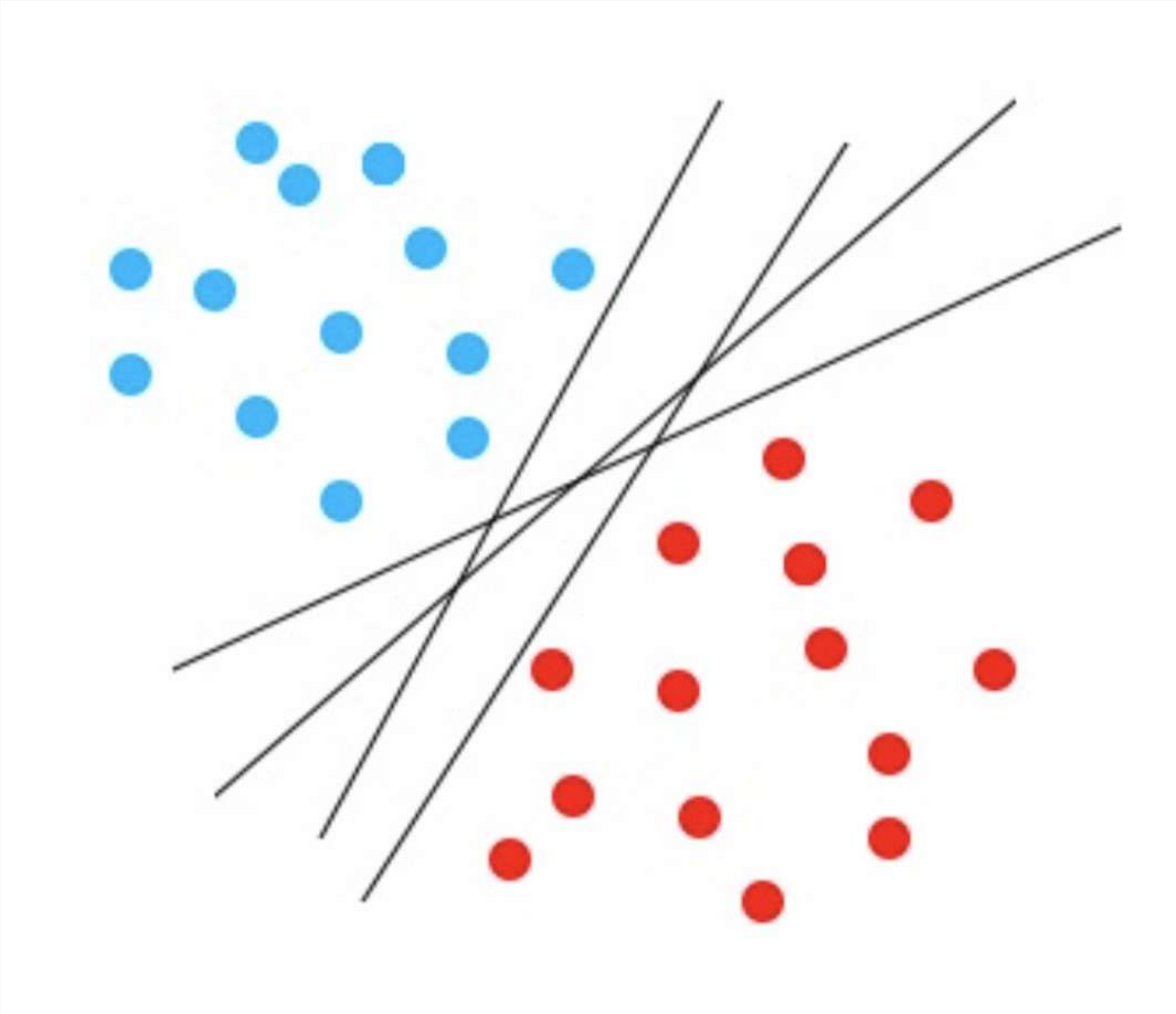
Support Vector Machines – Separadores de Gran Márgen

Máquinas de Vectores de Soporte

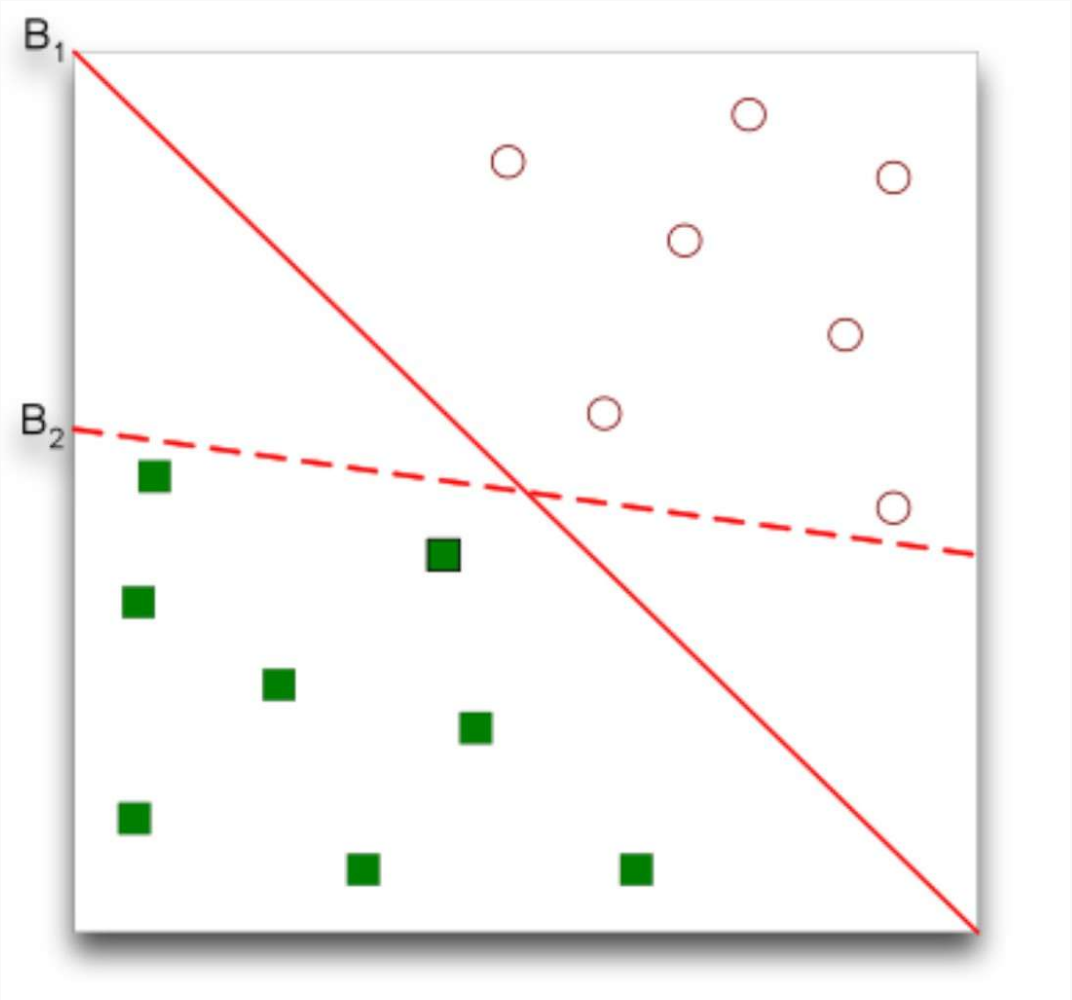
Buscan encontrar el margen que maximiza la separación entre las diferentes clases de datos.



SVM lineal: ¿Qué plano elegir?

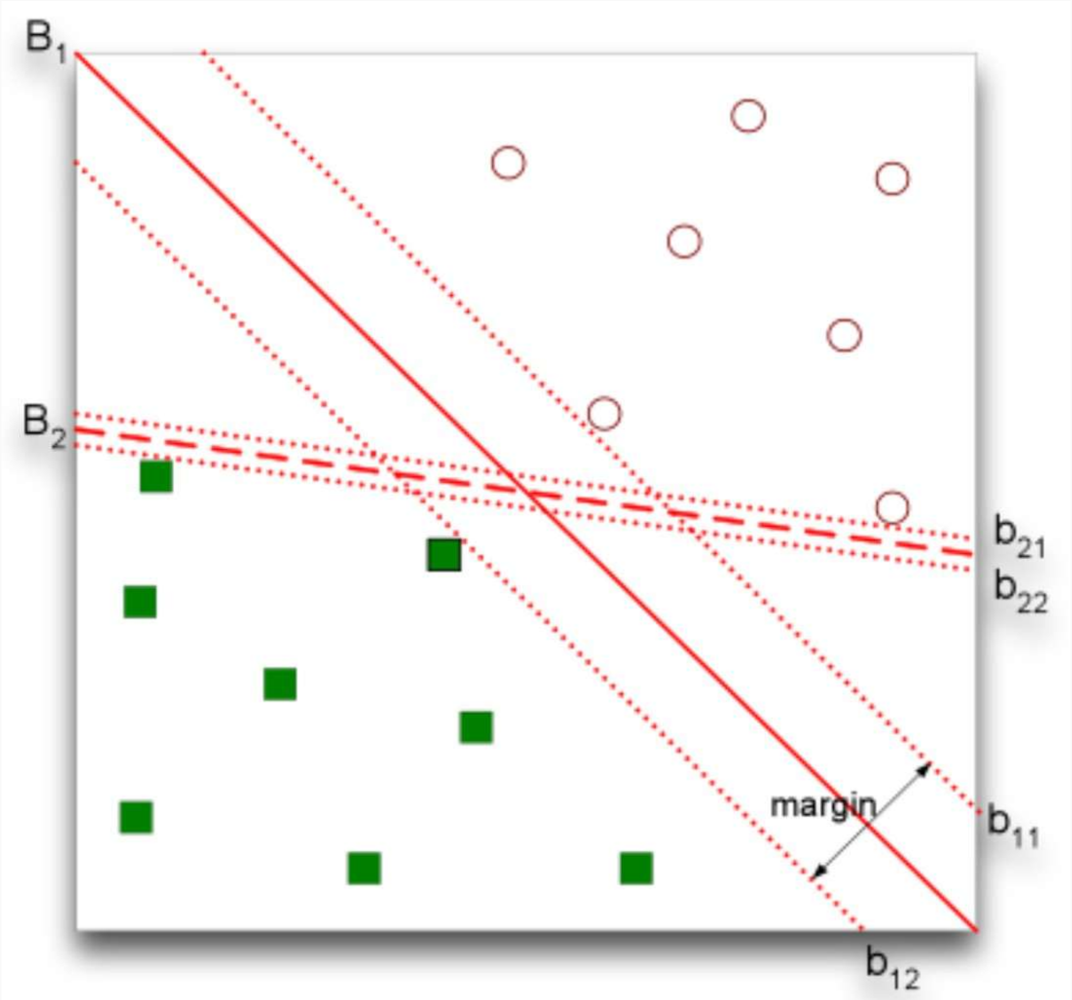


SVM lineal: ¿Qué plano elegir?



- Cual es el mejor? B_1 o B_2?

SVM lineal: ¿Qué plano elegir?

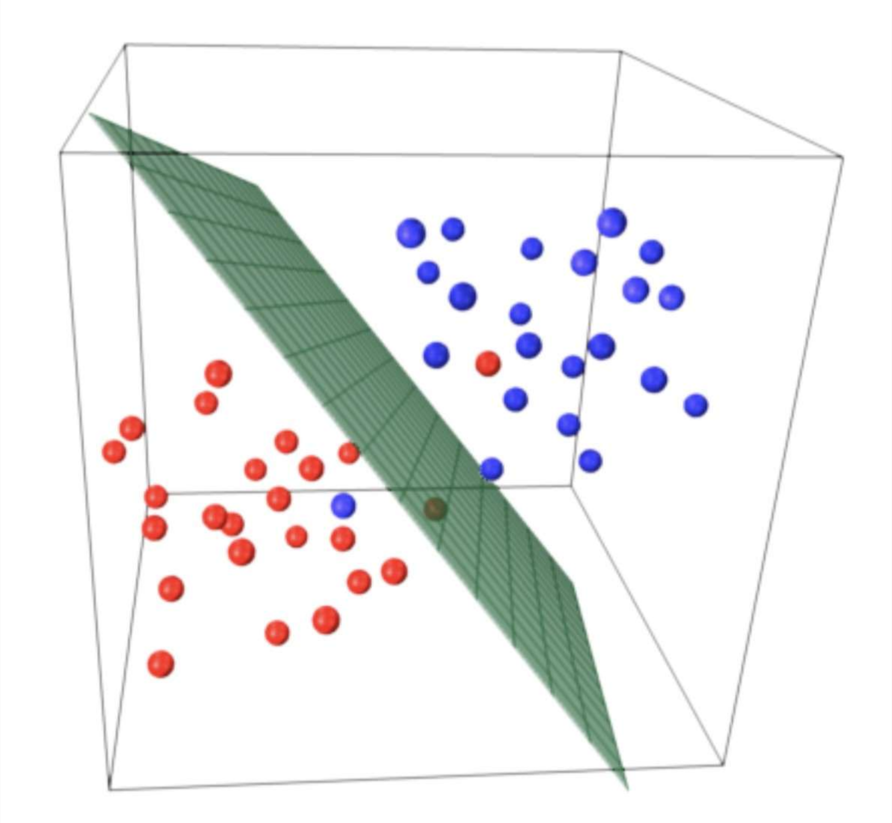


- Cual es el mejor? B_1 o B_2? → B_1
- Encontrar un hiperplano que maximice el margen de entrenamiento (menores errores de generalización, i.e., menos especifico a los datos)

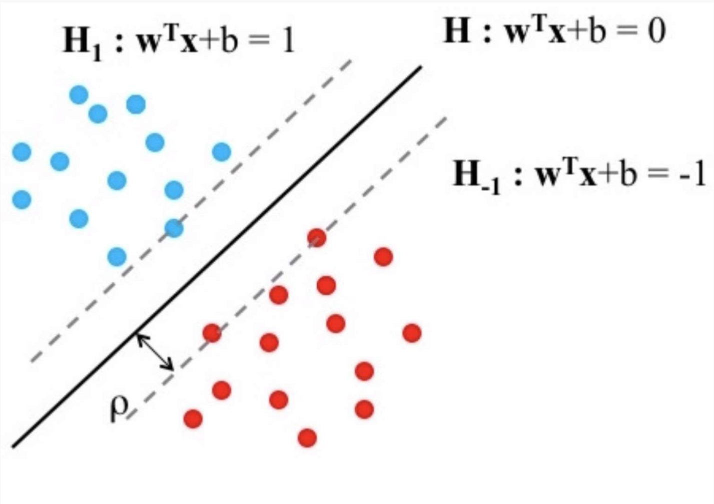
Clasificador lineal: recordatorio

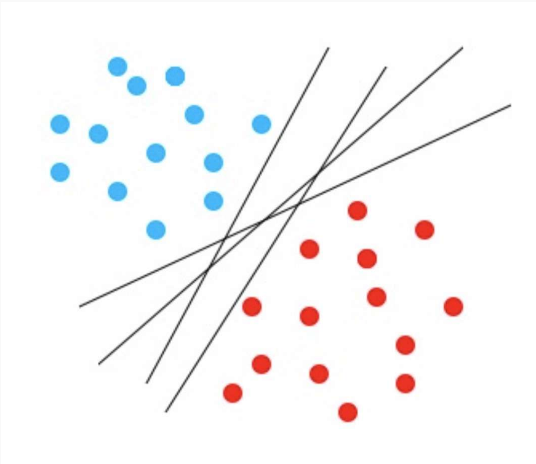
Resumen

- $\mathbf{X} \in \mathrm{R}^d$ es el vector de descriptores.
- La ecuación $\mathbf{W}^T\mathbf{X} + b = 0$ define un hiperplano en R^d.
- $f_{\mathbf{W},b}(\mathbf{X}) = signo(\mathbf{W}^T\mathbf{X} + b)$ da la clase de $\mathbf{X}$.



SVM lineal



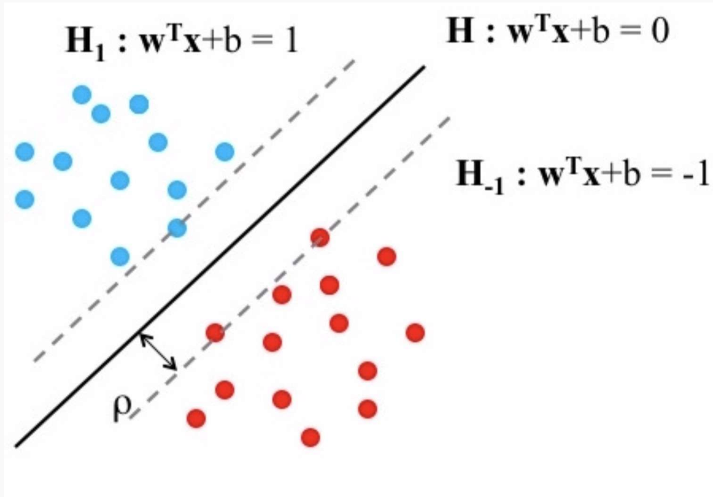


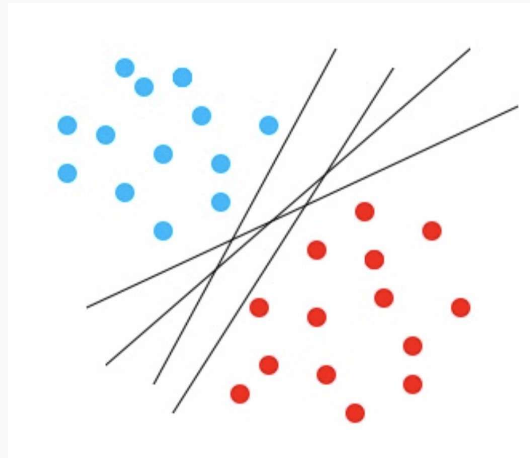
- Clasificador lineal: $signo(\mathbf{W}^T\mathbf{X} + b)$.
- Funciona en el caso separable: $\exists(\mathbf{W}, b), \forall i, Y_i(\mathbf{W}^T\mathbf{X} + b) > 0$.

Como elegir W y b para maximizar el margen ρ

- Separación estricta: $\exists(\mathbf{W}, b), \forall i, Y_i(\mathbf{W}^T\mathbf{X} + b) \geq 1$.
- Maximización de la distancia entre $\mathbf{W}^T\mathbf{X} + b = 1$ y $\mathbf{W}^T\mathbf{X} + b = -1$.
- Equivale a minimizar $||\mathbf{W}||$

SVM lineal



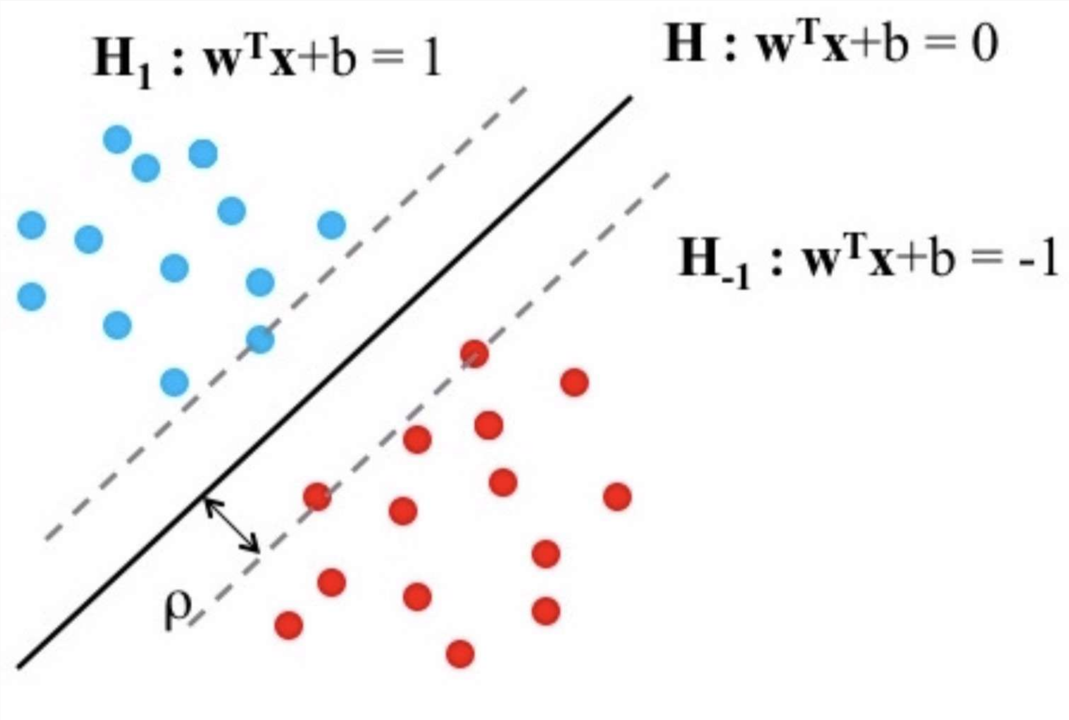


- Clasificador lineal: $signo(\mathbf{W}^T\mathbf{X} + b)$.
- Funciona en el caso separable: $\exists(\mathbf{W}, b), \forall i, Y_i(\mathbf{W}^T\mathbf{X} + b) > 0$.

Como elegir W y b para maximizar el margen ρ

- Separación estricta: $\exists(\mathbf{W}, b), \forall i, Y_i(\mathbf{W}^T\mathbf{X} + b) \geq 1$.
- Maximización de la distancia entre $\mathbf{W}^T\mathbf{X} + b = 1$ y $\mathbf{W}^T\mathbf{X} + b = -1$.
- Equivale a minimizar $||\mathbf{W}||$ Pregunta → ¿Por qu´e?

SVM lineal: margen



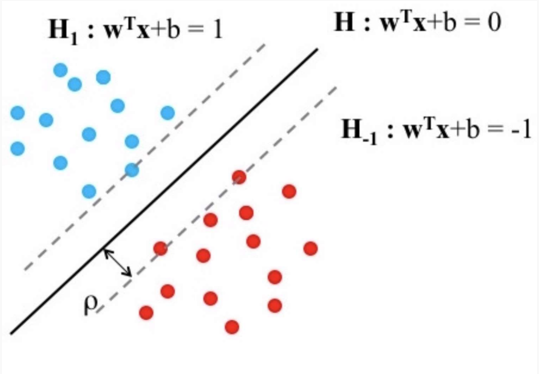
Concepto de margen geoéetrico

- Para separar los datos, consideramos un trío de hiperplanos:

$$\mathbf{H} : \mathbf{W}^T\mathbf{X} + b = 0, \quad \mathbf{H}1 : \mathbf{W}^T\mathbf{X} + b = 1, \quad \mathbf{H}-1 : \mathbf{W}^T\mathbf{X} + b = -1,$$

- El margen geométrico $\rho(\mathbf{W})$ es la distancia más pequeña entre los datos y $\mathbf{H}$, es decir, la mitad de la distancia entre $\mathbf{H}1$ y $\mathbf{H}-1$.
- Un cálculo simple da $\rho(\mathbf{W}) = \frac{1}{||\mathbf{W}||}$

SVM lineal



- La distancia ρ es igual a $\frac{1}{||\mathbf{W}||}$: maximizar ρ es equivalente a minimizar $||\mathbf{W}||$.
- Atención: siempre bajo la restricción de clasificar correctamente, ¡con un margen!

Optimización: Problema primal

$$\underset{\mathbf{W}}{\text{minimizar}} \quad \frac{1}{2}||\mathbf{W}||^2$$

$$\text{sujeto a} \quad \forall i,\ Y_i(\mathbf{W}^T\mathbf{X}_i + b) \geq 1$$

Lagrangiano

Problema primal de optimización

$$\underset{\mathbf{W},b}{\text{minimizar}} \quad \frac{1}{2}||\mathbf{W}||^2$$
$$\text{sujeto a} \quad \forall i, Y_i(\mathbf{W}^T\mathbf{X}_i + b) \geq 1$$

Solución: Método de los multiplicadores de Lagrange

El método de los multiplicadores de Lagrange permite encontrar los puntos estacionarios (máximo, mínimo...) de una función derivable de una o varias variables, bajo restricciones.

Problema del tipo:

$$(\mathcal{P}) : \underset{\mathbf{X}\in\mathbb{R}^n}{J(\mathbf{X})}, \quad \text{bajo restricciones} \quad g_i(\mathbf{X}) \leq 0, \quad i = 1..p$$

- Lagrangiano: $\mathcal{L}(\mathbf{X}, \lambda) = J(\mathbf{X}) + \lambda^T g(\mathbf{X}), \lambda \geq 0, \lambda \in \mathbb{R}^q$
- λ son los parámetros de Lagrange

SVM: Lagrangiano aplicado al SVM I

Lagrangiano

$$\mathcal{L}(\mathbf{X}, \lambda) = \frac{1}{2}||\mathbf{W}||^2 + \sum_i \alpha_i(1 - Y_i(\mathbf{W}^T\mathbf{X}_i + b))$$

$$\forall i, \quad \alpha_i \geq 0$$

Condiciones de KKT (Karush-Kunh-Tucker)

En el extremo (lo que buscamos, porque queremos el mínimo), tenemos:

$$\nabla_{\mathbf{W}}\mathcal{L} = 0 \qquad \text{(estacionaridad)}$$

$$\nabla_b\mathcal{L} = 0 \qquad \text{(estacionaridad)}$$

$$\forall i, \quad \alpha_i(1 - Y_i(\mathbf{W}^T\mathbf{X}_i + b)) = 0 \qquad \text{(complementariedad)}$$

Nota: La complementariedad implica que si $1 \neq Y_i(\mathbf{W}^T\mathbf{X}_i + b)$ entonces $\alpha_i = 0$. Esto significa que o bien $\mathbf{X}_i$ está en uno de los planos de margen, o bien $\alpha_i = 0$.

SVM: Lagrangiano aplicado al SVM I

Lagrangiano

$$\mathcal{L}(\mathbf{X}, \lambda) = \frac{1}{2}||\mathbf{W}||^2 + \sum_i \alpha_i (1 - Y_i(\mathbf{W}^T\mathbf{X}_i + b))$$

$$\forall i, \quad \alpha_i \geq 0$$

Condiciones de KKT (Karush-Kunh-Tucker)

En el extremo (lo que buscamos, porque queremos el mínimo), tenemos:

$$\mathbf{W} = \sum_i \alpha_i Y_i \mathbf{X}_i \qquad \text{(estacionaridad)}$$

$$\sum_i \alpha_i Y_i = 0 \qquad \text{(estacionaridad)}$$

$$\forall i, \quad \alpha_i(1 - Y_i(\mathbf{W}^T\mathbf{X}_i + b)) = 0 \qquad \text{(complementariedad)}$$

Nota: La complementariedad implica que si $1 \neq Y_i(\mathbf{W}^T\mathbf{X}_i + b)$ entonces $\alpha_i = 0$. Esto significa que o bien $\mathbf{X}_i$ está en uno de los planos de margen, o bien $\alpha_i = 0$.

SVM: Lagrangiano aplicado al SVM II

Condiciones de KKT (Karush-Kuhn-Tucker)

Significa que:

- O bien $\mathbf{X}_i$ está en uno de los planos de margen, o bien $\alpha_i = 0$
- Hay al final pocos multiplicadores de Lagrange α_k que non son cero
- Estos $\mathbf{X}_k$ se llaman vectores de soporte
- Los parámetros $\mathbf{W}$ y b, que definen el límite de decisión, dependen sólo de los vectores de soporte

SVM: Lagrangiano y dual

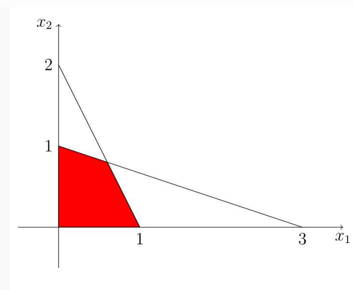
Solución del problema dual

Mucho mas practicale de encontrar la solución del dual que del primal:

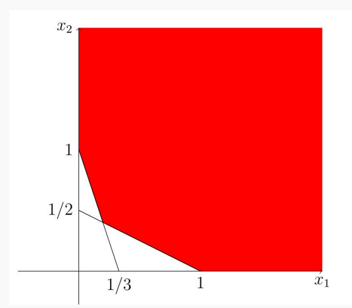
$$\text{Maximizar}_{\alpha} \quad \sum_i \alpha_i - \frac{1}{2}\sum_{i,j} \alpha_i \alpha_j y_j y_i \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j$$

$$\text{sujeto a} \quad \forall i, \alpha_i \geq 0, \ \text{ademas} \sum_i \alpha_i y_i = 0$$

$$\begin{aligned} &\min \quad z = c^t x, \\ &Ax \geq b, \\ &x \geq 0. \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} &\max \quad z = b^t y, \\ &A^t y \leq c, \\ &y \geq 0. \end{aligned}$$



SVM: Lagrangiano y dual

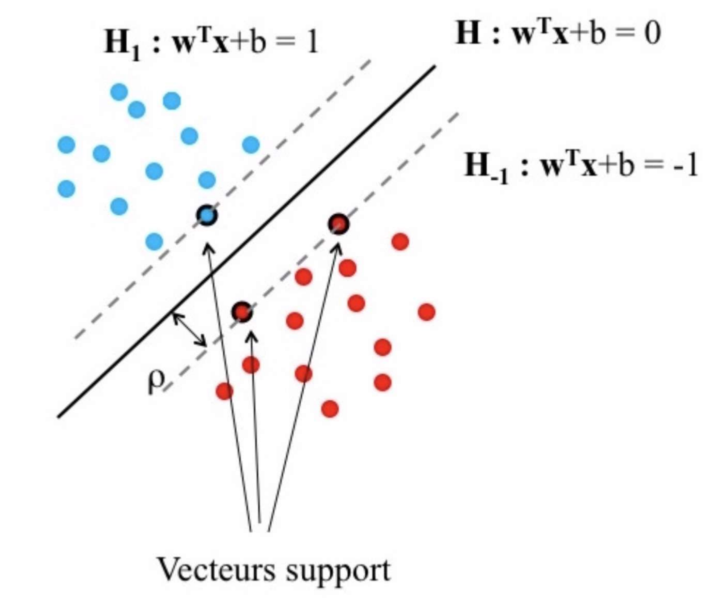
- El Lagrangiano dual involucra sólo los multiplicadores de Lagrange y los datos de entrenamiento (depende de menos parámetros).
- Mientras que el Lagrangiano primal involucra los multiplicadores de Lagrange así como los parámetros del hiperplano separador $\mathbf{W}$ y b.
- El problema de minimización original para el Lagrangiano primal L se convierte en un problema de maximización para el Lagrangiano dual $\mathrm{L}_d(\mathbf{X}, \alpha)$.
- Como este es un problema de optimización convexo las soluciones para ambos problemas de optimización son equivalentes (siempre y cuando nuestra solución satisfaga las condiciones KKT).

SVM lineal: Vectores de soporte

Los α_i siendo determinados, podemos reescribir la función del clasificador:

$$f(\mathbf{X}) = \text{signo}(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i Y_i \mathbf{X}_i^T \mathbf{X} + b)$$

porque en el óptimo $\mathbf{W} = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i Y_i \mathbf{X}_i$ (KKT - estacionaridad)

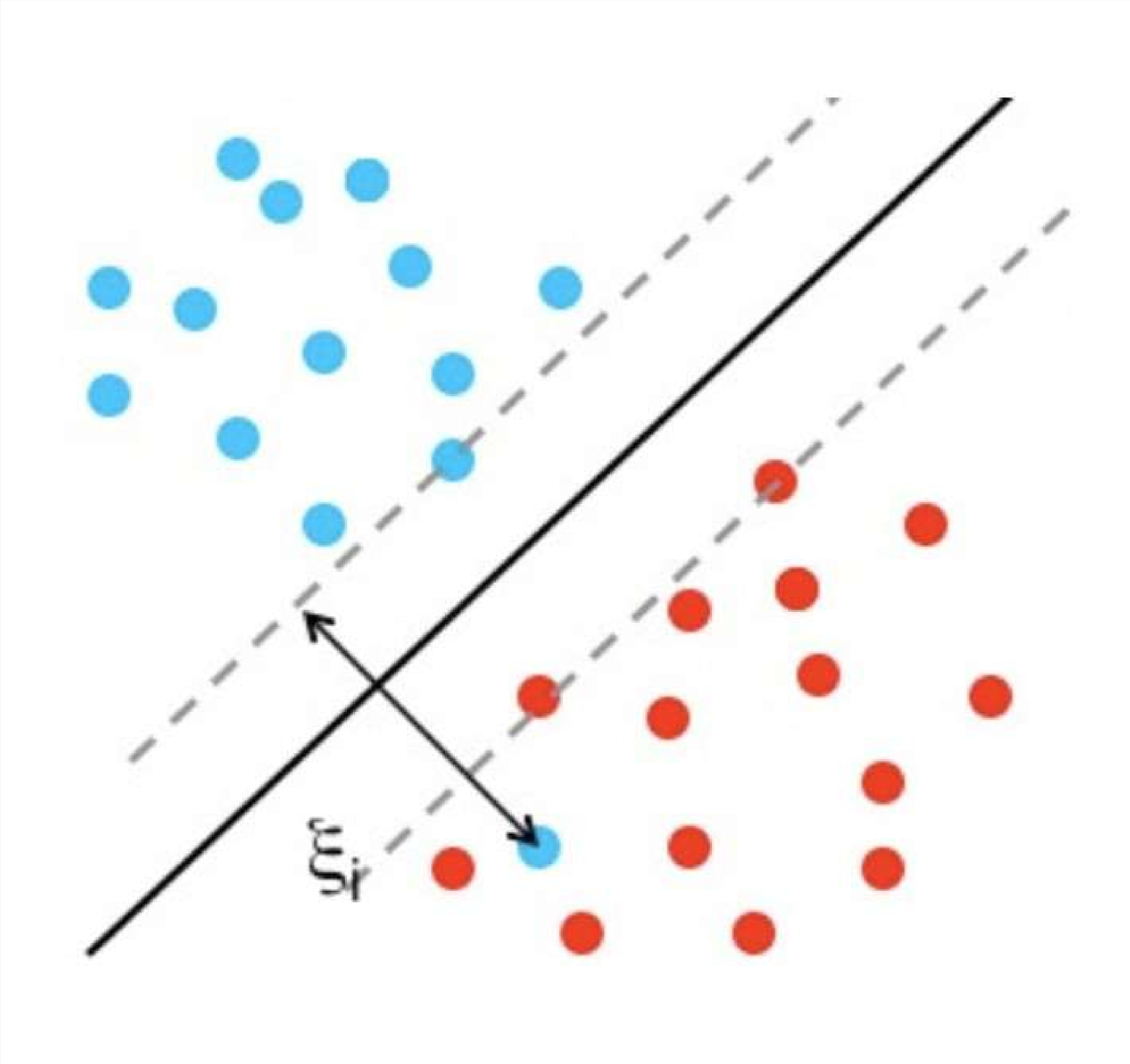


Vectores de soporte

Dado que o bien α_i es nulo, o bien el vector $\mathbf{X}_i$ está en uno de los planos, llamamos a estos vectores los soportes.

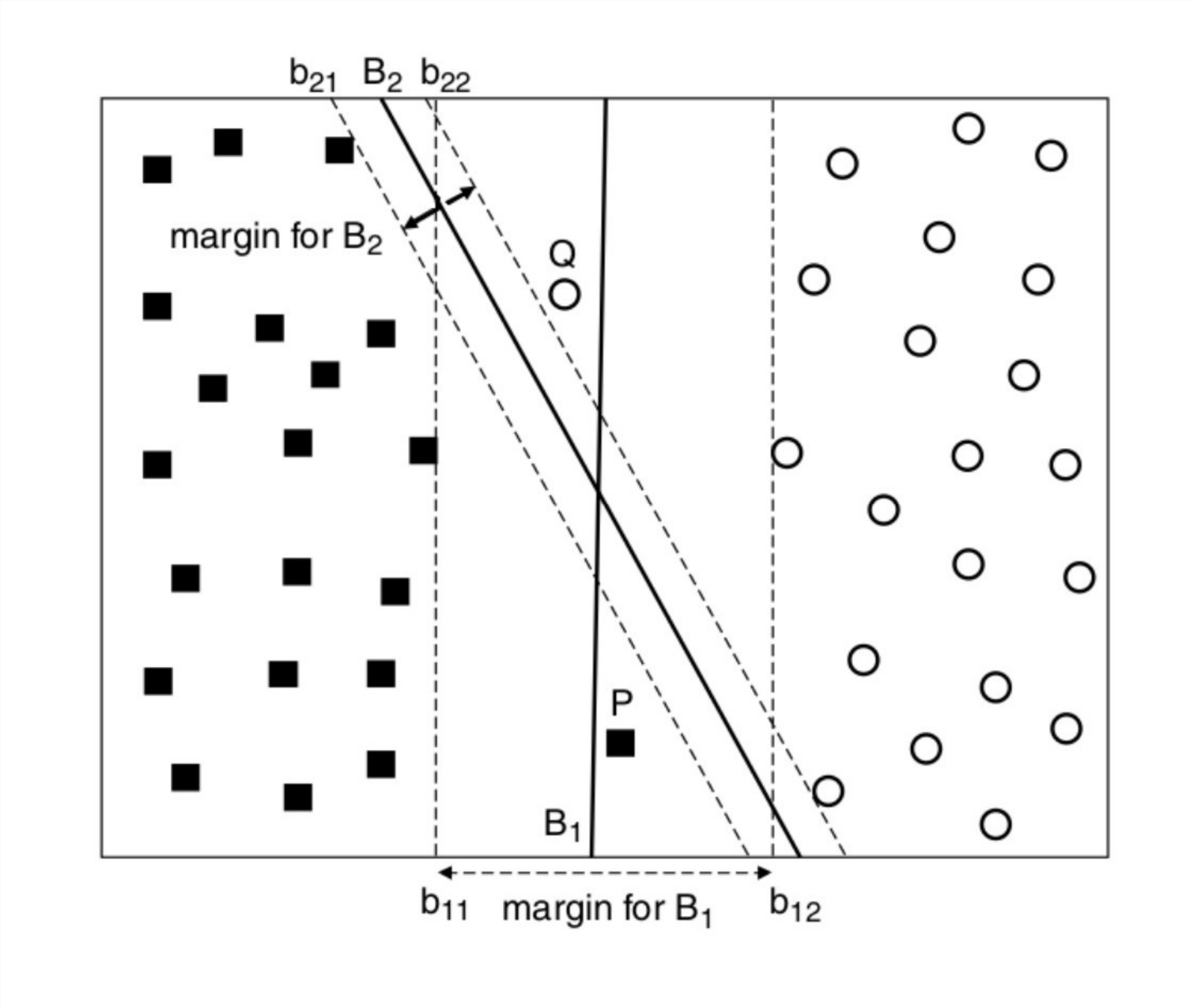
SVM lineal: datos no separables

Funciona también cuando es ruidoso, pq la primera formulación no sirve:



SVM lineal: datos no separables o ruidosos

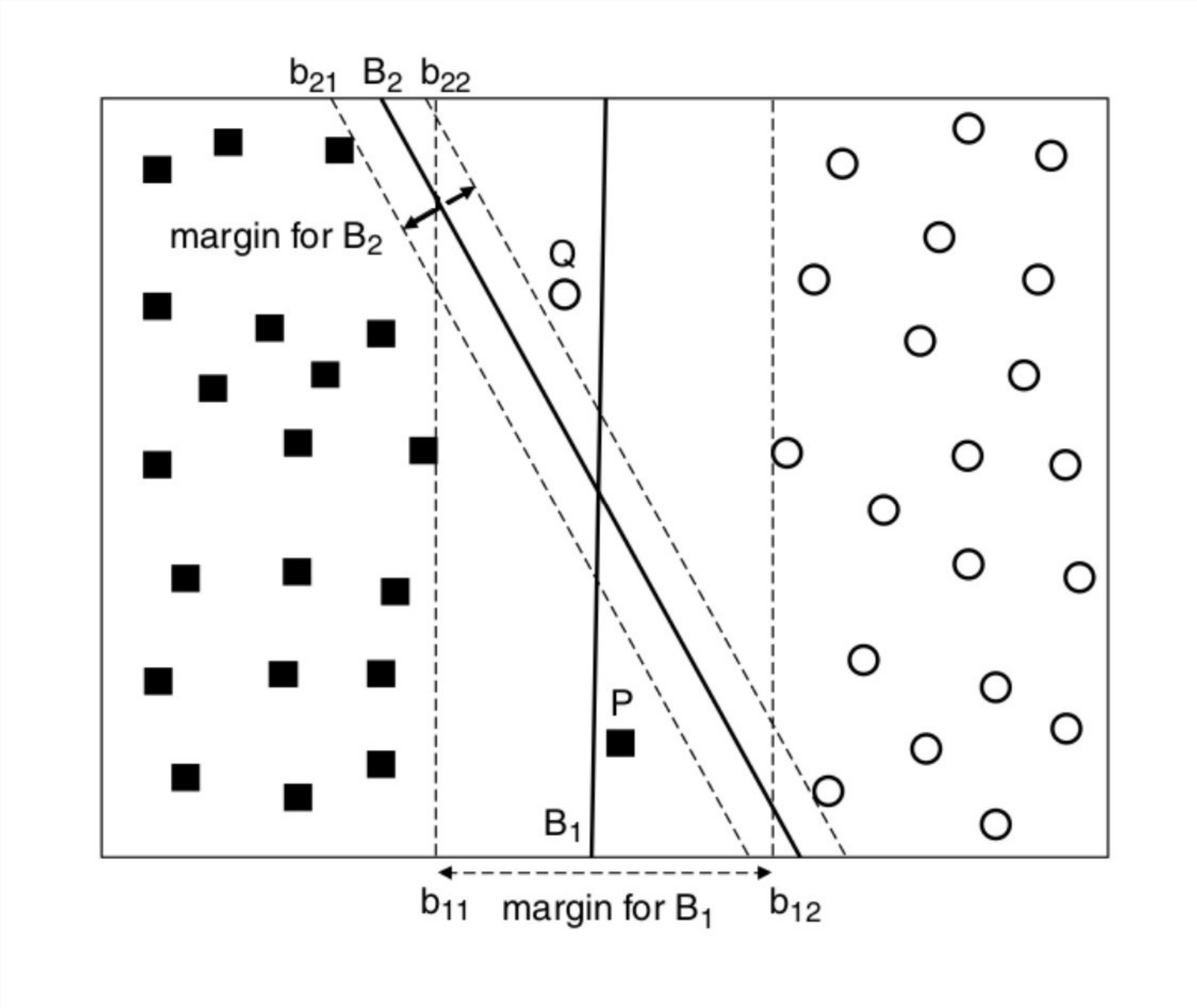
Funciona también cuando es ruidoso, pq la primera formulación no sirve:



Acá tenemos dos hiperplanos separadores posibles B_1 y B_2

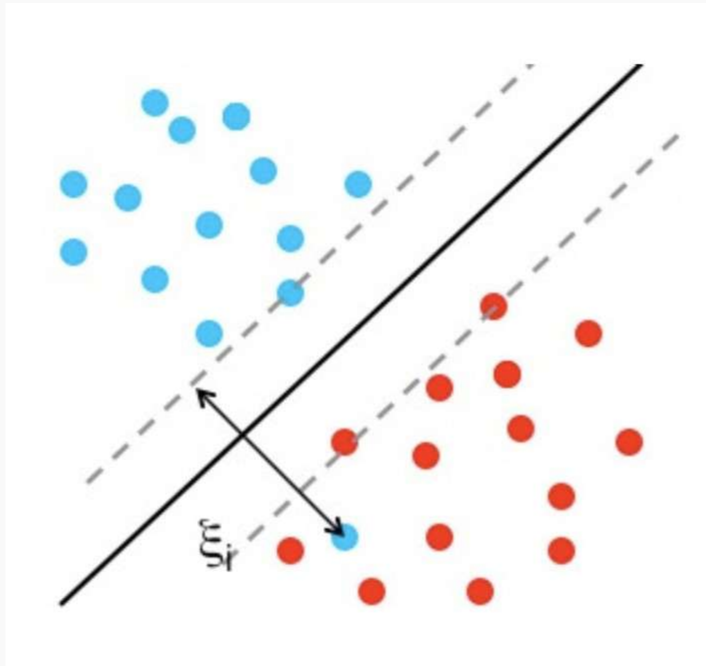
SVM lineal: datos no separables o ruidosos

Funciona también cuando es ruidoso, pq la primera formulación no sirve:



Acá tenemos dos hiperplanos separadores posibles B_1 y $B_2 \rightarrow B_1$ es mejor!

SVM lineal: soft margin

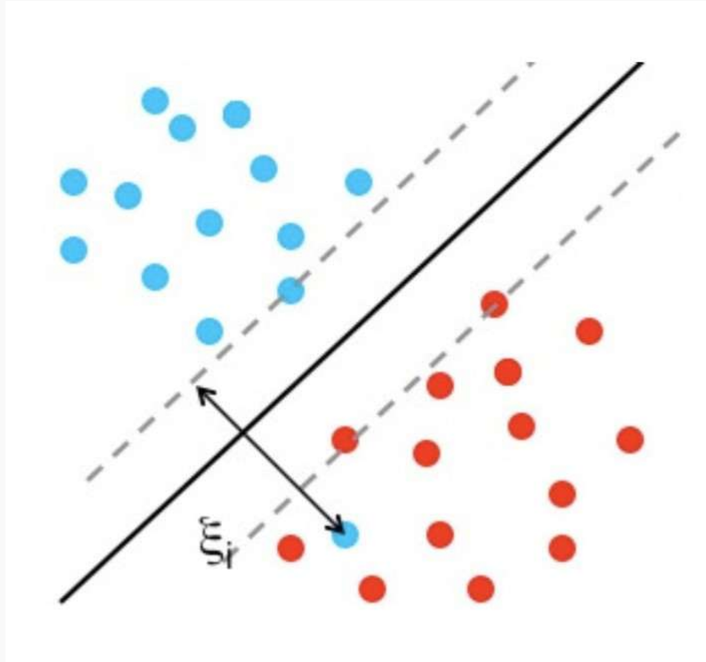


Introducción de ξ_i – Problema en el primal

$$
\begin{aligned}
&\underset{\mathbf{w},b}{\text{minimizar}} && \frac{1}{2}||\mathbf{w}||^2 + C\sum_i \xi_i \\
&\text{sujeto a} && \forall i,\ Y_i(\mathbf{w}^T\mathbf{X}_i + b) \geq 1 - \xi_i \\
& && \xi_i \geq 0
\end{aligned}
$$

Rq: C equivale a un parámetro de regularización

SVM lineal: soft margin



Introducción de ξ_i – Problema en el primal

$$\underset{\mathbf{W},b}{\text{minimizar}} \quad \frac{1}{2}||\mathbf{W}||^2 + C\sum_i \xi_i$$

$$\text{sujeto a} \quad \forall i,\ Y_i(\mathbf{W}^T\mathbf{X}_i + b) \geq 1 - \xi_i$$

$$\xi_i \geq 0$$

Rq: C equivale a un parámetro de regularización

SVM lineal: soft margin y dual

Después de las condiciones de KKT, obtenemos:

Solución del problema dual

$$\underset{\alpha}{\text{Maximizar}} \quad \sum_i \alpha_i - \frac{1}{2}\sum_{i,j} \alpha_i \alpha_j y_j y_i \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j$$

$$\text{sujeto a} \quad \forall i, 0 \le \alpha_i \le C, \text{ ademas} \sum_i \alpha_i y_i = 0$$

Notas:

- Algunos datos de soporte pueden estar en el otro lado de los planos H_1 o H_{-1}
- C es un hiperpar´ametro que controla el compromiso entre la complejidad del modelo y el número de errores de clasificación del modelo.

SVM lineal: enfoque con regularización

Optimización en el espacio primal

$$\min_{\mathbf{W},b} \sum_{i=1}^{n} max(1 - Y_i(\mathbf{W}^T\mathbf{X}_i + b), 0) + \lambda||\mathbf{W}^2||$$

- $f(\mathbf{X}) = \text{signo}(\mathbf{W}^T\mathbf{X} + b)$
- P´erdida (bisagra) : $\ell(\mathbf{X}, Y) = max(1 - Y_i(\mathbf{W}^T\mathbf{X} + b), 0)$
- λ es el par´ametro de regularización
- $Y_i(\mathbf{W}^T\mathbf{X} + b)$ se llama margen del clasificador

SVM lineal: enfoque con regularización

Optimización en el espacio primal

$$\min_{\mathbf{W},b} \sum_{i=1}^{n} max(1 - Y_i(\mathbf{W}^T\mathbf{X}_i + b), 0) + \lambda||\mathbf{W}^2||$$

- $f(\mathbf{X}) = \text{signo}(\mathbf{W}^T\mathbf{X} + b)$
- Pérdida (bisagra) : $\ell(\mathbf{X}, Y) = max(1 - Y_i(\mathbf{W}^T\mathbf{X} + b), 0)$
- λ es el parámetro de regularización
- $Y_i(\mathbf{W}^T\mathbf{X} + b)$ se llama margen del clasificador

Intuición: La función de perdida va a poner un costo cada vez que un ejemplo sea a -1 de distancia del hiperplano de separación, forzando los ejemplos a estar *(i)* del buen lado, *(ii)* mas lejos del HP posible, *(iii)* minimizando la norma del HP.

SVM lineal: enfoque con regularización

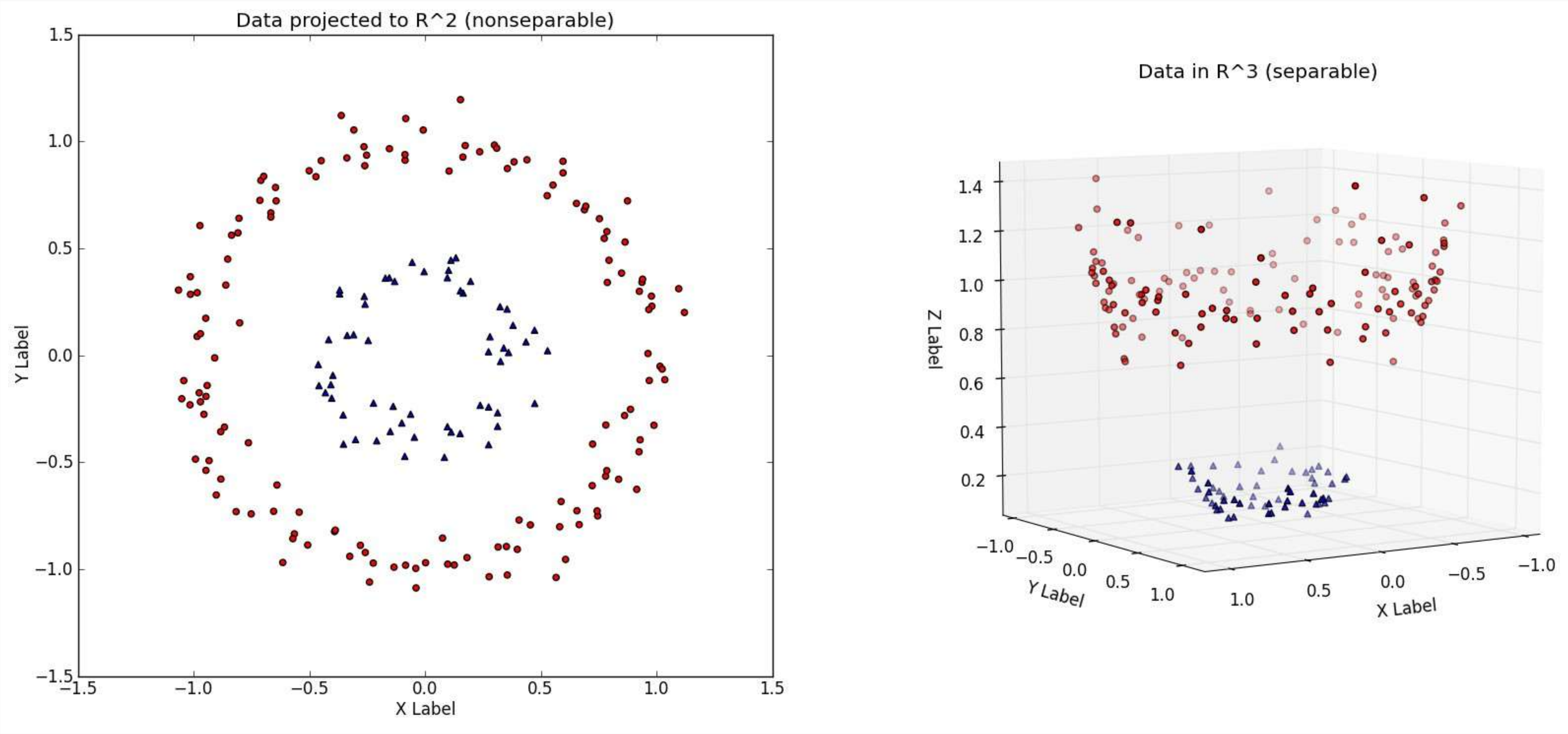
Optimización en el espacio primal

$$\min_{\theta} \sum_{i=1}^{n} \ell(Y_i, f_\theta(\mathbf{X}_i)) + pen(\theta)$$

- $f(\mathbf{X}) = \text{signo}(\mathbf{W}^T\mathbf{X} + b)$
- P´erdida (bisagra) : $\ell(\mathbf{X}, Y) = max(1 - Y_i(\mathbf{W}^T\mathbf{X} + b), 0)$
- λ es el par´ametro de regularizaci´on
- $Y_i(\mathbf{W}^T\mathbf{X} + b)$ se llama margen del clasificador

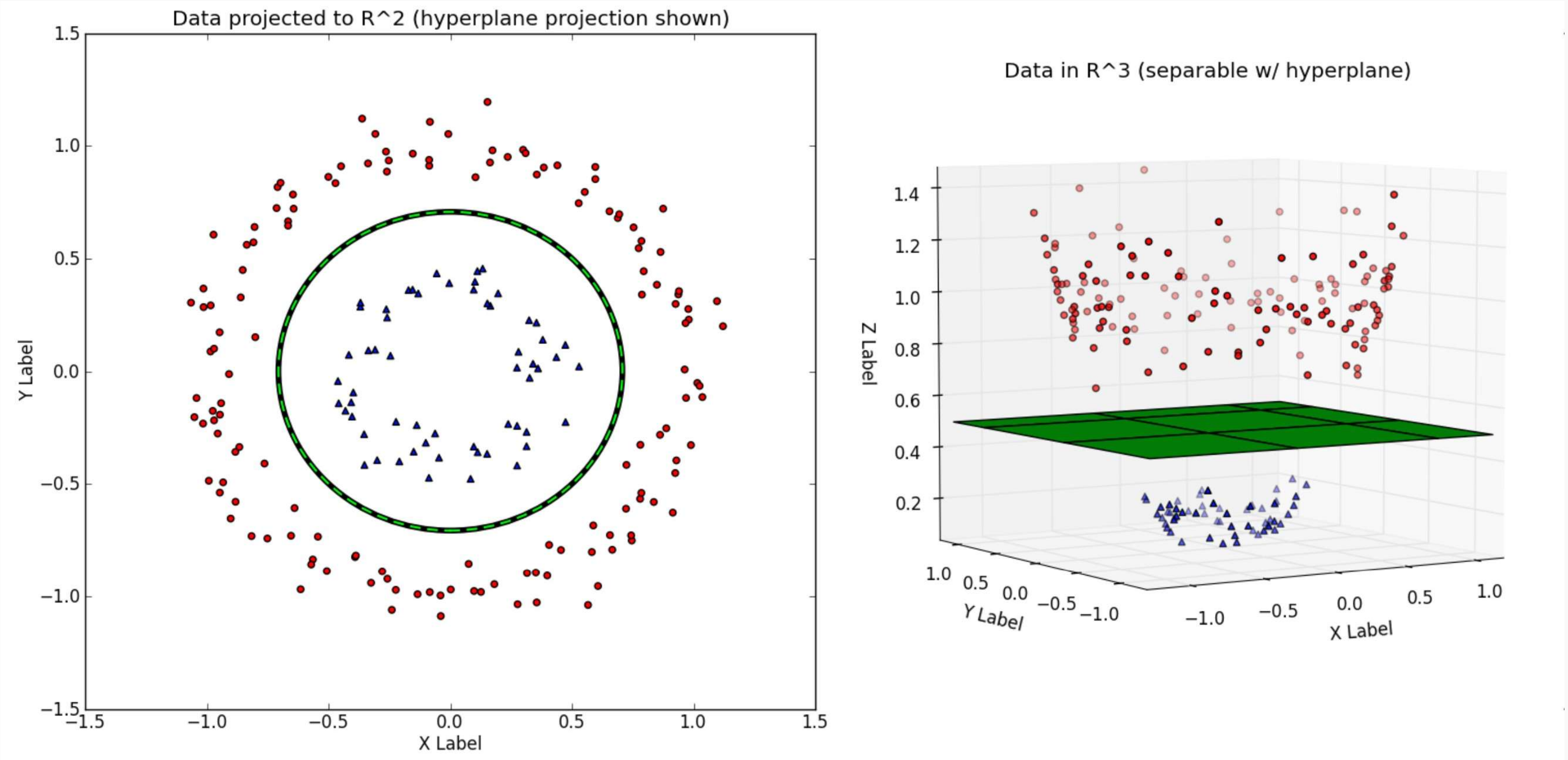
Intuici´on: La función de perdida va a poner un costo cada vez que un ejemplo sea a -1 de distancia del hiperplano de separación, forzando los ejemplos a estar *(i)* del buen lado, *(ii)* mas lejos del HP posible, *(iii)* minimizando la norma del HP.

SVM con kernel: aumento del espacio



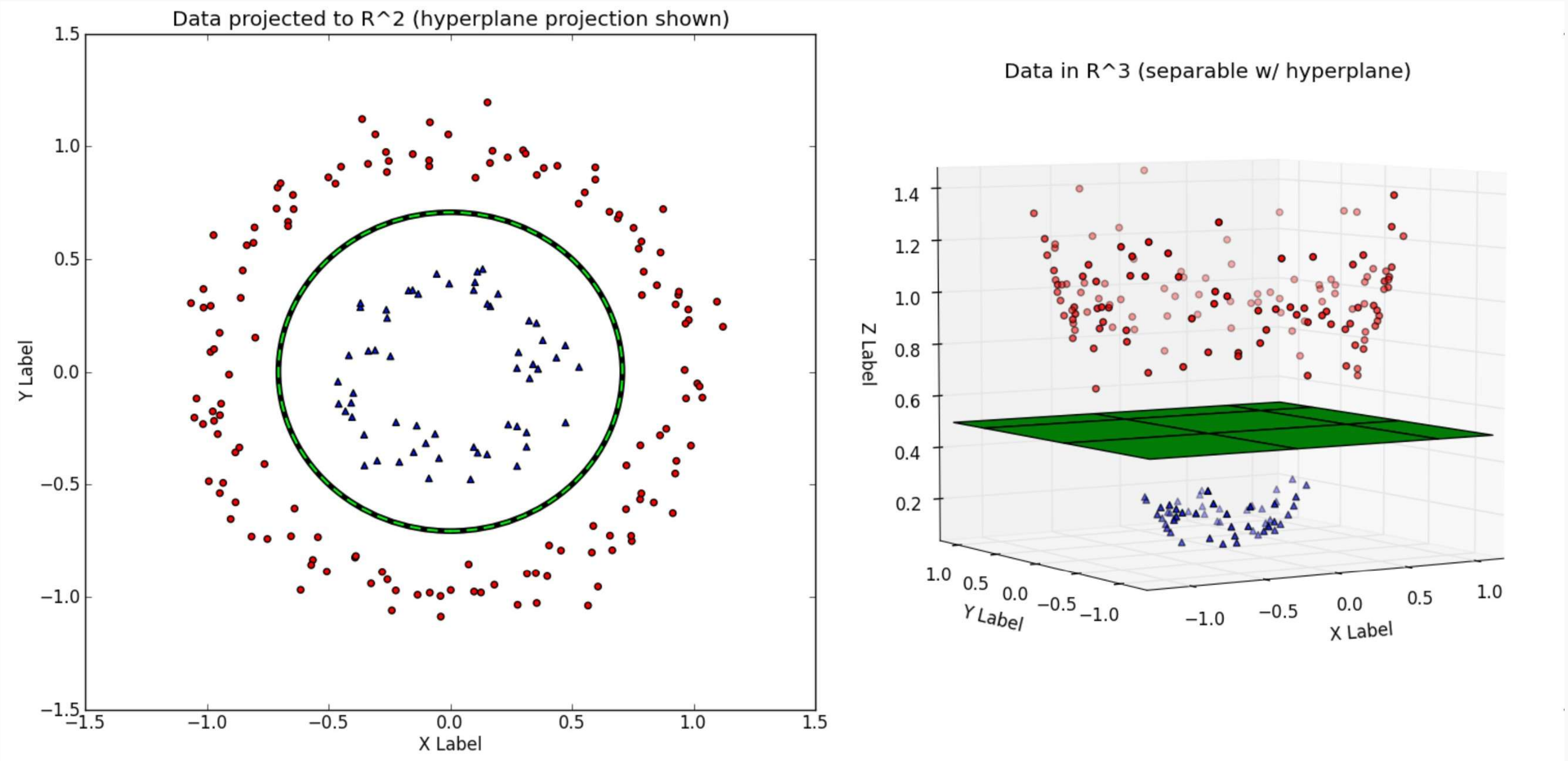
Recordatorio: Si pasamos a una dimensión mas alta, podemos resolver un problema non lineal como lineal

SVM con kernel: aumento del espacio



Recordatorio: Si pasamos a una dimensión mas alta, podemos resolver un problema non lineal como lineal

SVM con kernel: aumento del espacio



Recordatorio: Si pasamos a una dimensión mas alta, podemos resolver un problema non lineal como lineal

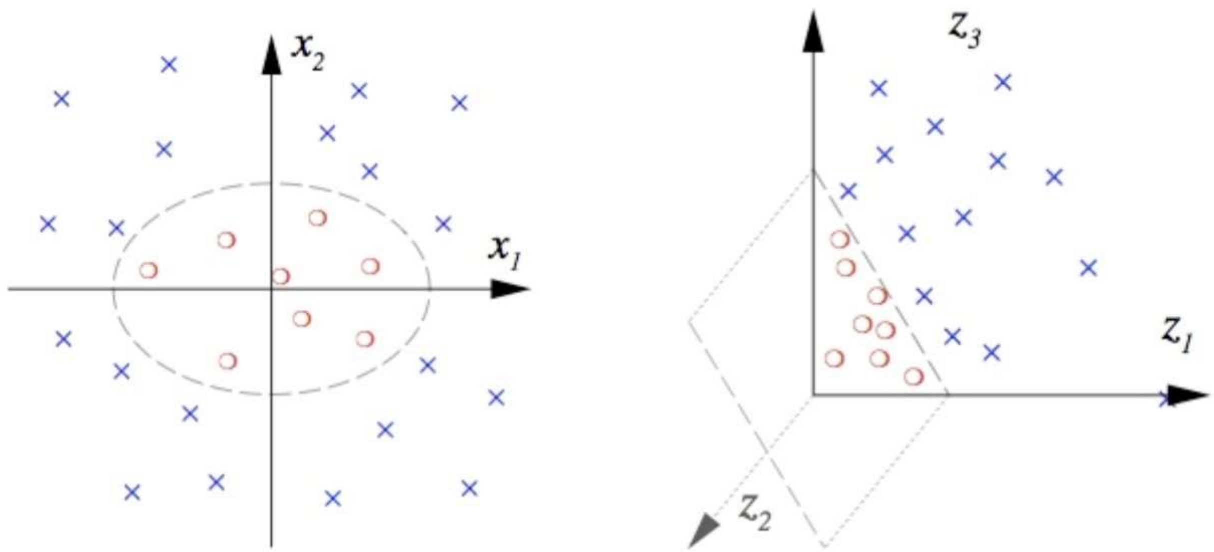
Peligro: Curse of dimensionality !! **W** es mas grande

SVM con kernel: Kernel Trick

I. El problema inicial solo implica el cálculo de productos escalares $\mathbf{X}_i^T \mathbf{X}_j$
II. Si transformamos los datos usando una función no lineal φ, solo necesito saber calcular $\varphi(\mathbf{X}_i)^T \varphi(\mathbf{X}_j)$
III. Para un nuevo dato $\mathbf{X}$, necesitamos saber calcular $\varphi(\mathbf{X})^T \varphi(\mathbf{X}_j)$
IV. Podemos reemplazar $\mathbf{X}_i^T \mathbf{X}_j$ por una función k llamada **núcleo**, tal que $k(\mathbf{X}_i, \mathbf{X}_j) = \varphi(\mathbf{X})^T \varphi(\mathbf{X}_j)$
V. . Teorema de Aronzajn: La matriz $K = (k(\mathbf{X}_i, \mathbf{X}_j))_{i,j}$ es definida positiva $\Leftrightarrow \exists \varphi$ tal que $k(\mathbf{X}_i, \mathbf{X}_j) = \varphi(\mathbf{X})^T \varphi(\mathbf{X}_j)$
VI. . $\mathbf{W}$ es ahora de la misma dimensión que el espacio de llegada de φ

SVM con kernel: Kernel Trick

$$\Phi : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^3$$
$$(x_1, x_2) \mapsto (z_1, z_2, z_3) := (x_1^2, \sqrt{2}\, x_1 x_2, x_2^2)$$



Reemplazo de $\mathbf{X}$ por una transformación no lineal $\Phi(\mathbf{X})$:
el clasificador esta $f(\mathbf{X}) = \text{signo}(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i Y_i (\Phi(\mathbf{X}_i)^T \Phi(\mathbf{X}) + b))$

Truco del kernel: no necesitas conocer la función Φ

- El cálculo de $k(\mathbf{X}, \mathbf{X}') = \langle \Phi(\mathbf{X}) | \Phi(\mathbf{X}') \rangle$ es más simple que el de $\Phi(\mathbf{X})$ y $\Phi(\mathbf{X}')$ luego del producto escalar
- Φ puede ser especificada a través de su núcleo positivo k

Ejemplo de Kernel Trick

Tomamos: $\Phi : (x_1, x_2) \to (x_1^2, \sqrt{2}x_1x_2, \sqrt{2}x_1, \sqrt{2}x_2, x_2^2, 1)$

$$\Phi(u,v) = u_1^2v_1^2 + 2u_1u_2v_1v_2 + u_2^2v_2^2 + 2u_1v1 + 2u_2v2 + 1$$

$$\Phi(u,v) = (u_1v_1 + u_2v_2 + 1)^2$$

$$\Phi(u,v) = (\langle u\ ,\ v\rangle + 1)^2$$

El producto punto en el espacio transformado se puede expresar como una función de similitud en el espacio original:

$$K(u,v) = \Phi(u,v) = (\langle u\ ,\ v\rangle + 1)^2$$

Una SVM clasificaría un ejemplo nuevo **X** de la siguiente forma:

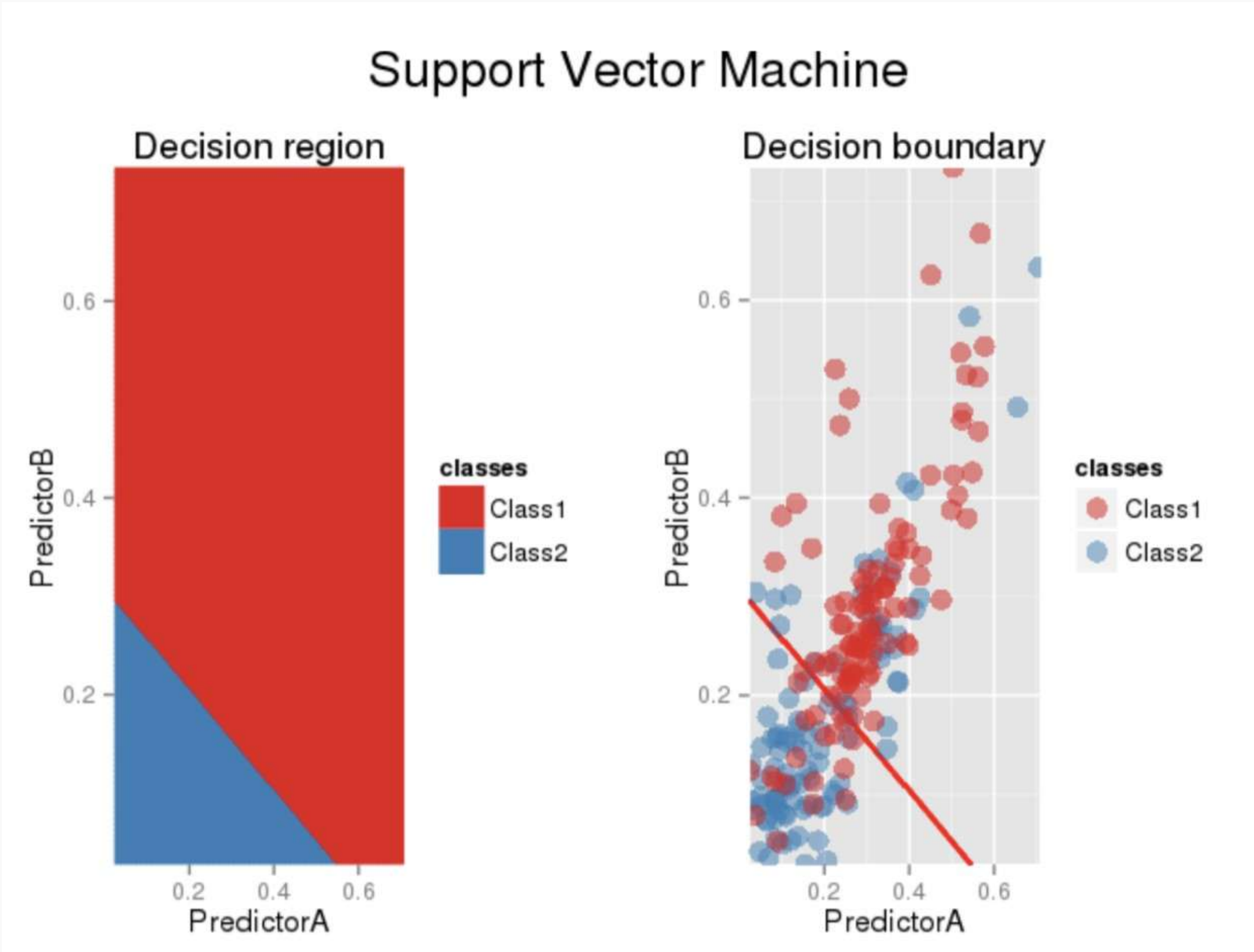
$$f(\mathbf{X}) = \text{signo}(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i Y_i(\Phi(\mathbf{X}_i)^T \Phi(\mathbf{X}) + b))$$

$$f(\mathbf{X}) = \text{signo}(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i Y_i(K(\mathbf{X}_i^T \mathbf{X}) + b))$$

$$f(\mathbf{X}) = \text{signo}(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i Y_i((\langle \mathbf{X}_i\ ,\ \mathbf{X}\rangle + 1)^2 + b))$$

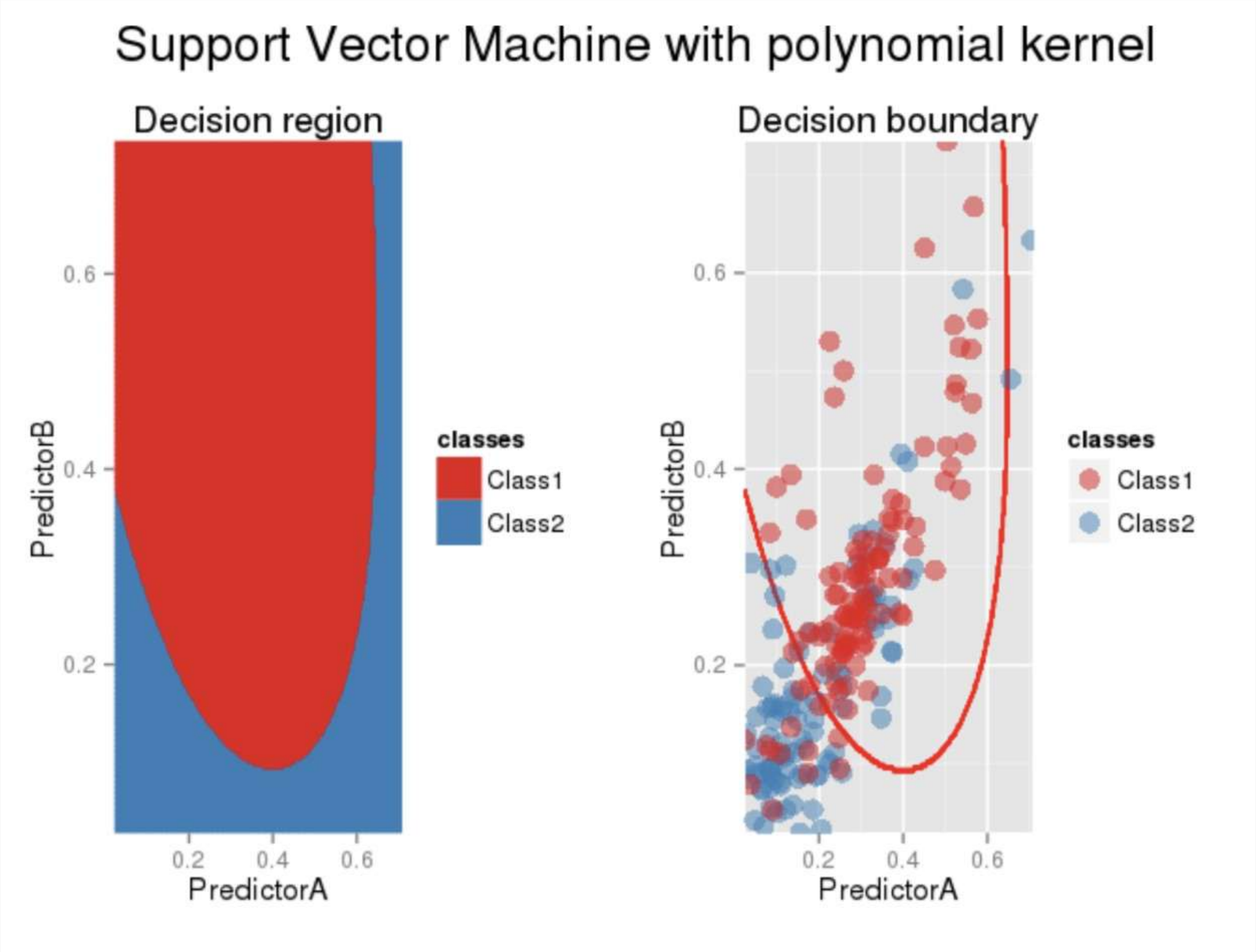
SVM lineal

$$\text{Núcleo lineal} : k(\mathbf{X}, \mathbf{X}') = \langle \mathbf{X} | \mathbf{X}' \rangle$$



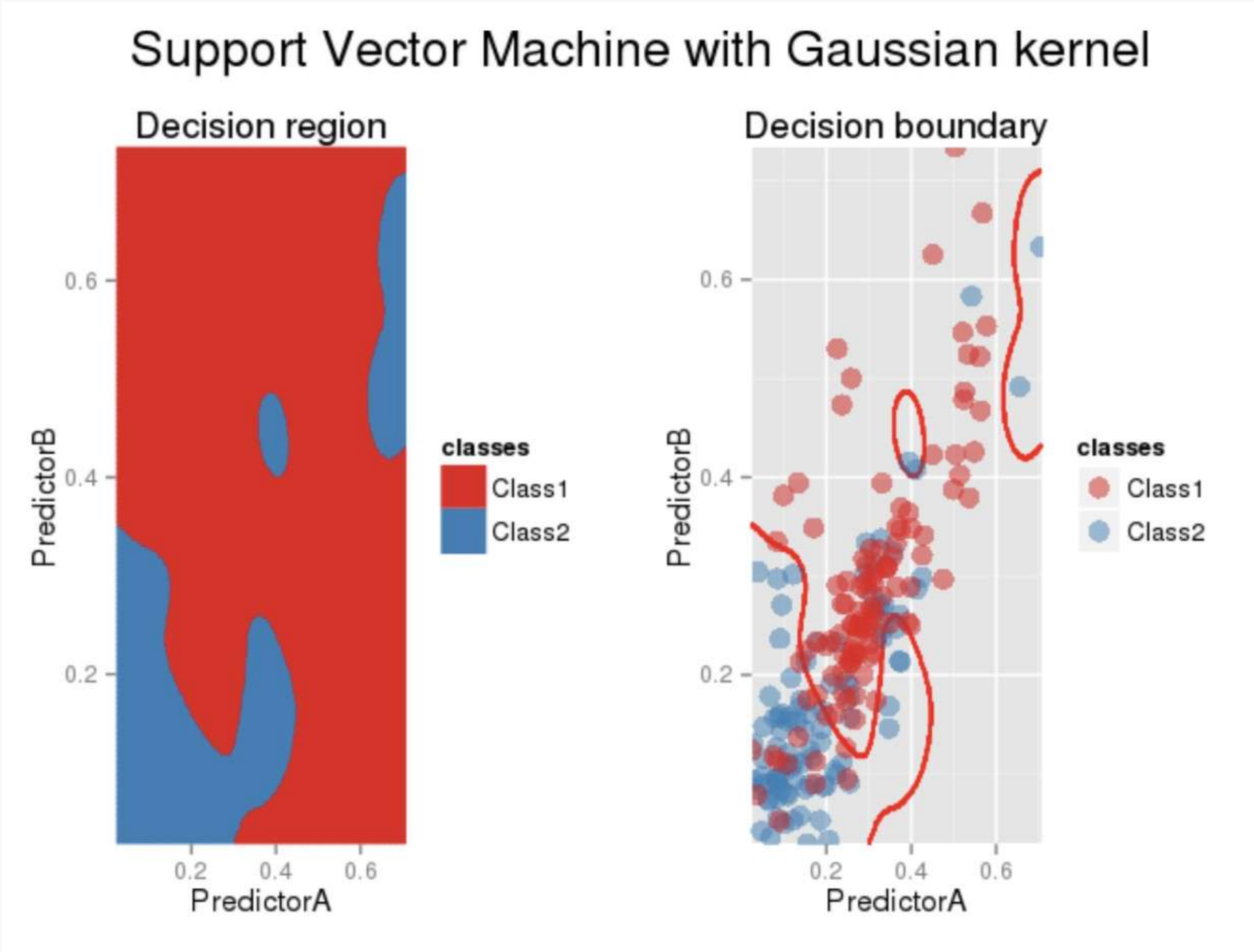
SVM: núcleo polinomial

Núcleo polinomial : $k(\mathbf{X}, \mathbf{X}') = (1 + \langle \Phi(\mathbf{X}) | \Phi(\mathbf{X}') \rangle)^d$



SVM: núcleo gaussiano

$$\text{Núcleo Gaussiano}: k(\mathbf{X}, \mathbf{X}') = \exp^{\frac{-||\mathbf{x}-\mathbf{x}'||^2}{2}}$$



SVM: Conclusion

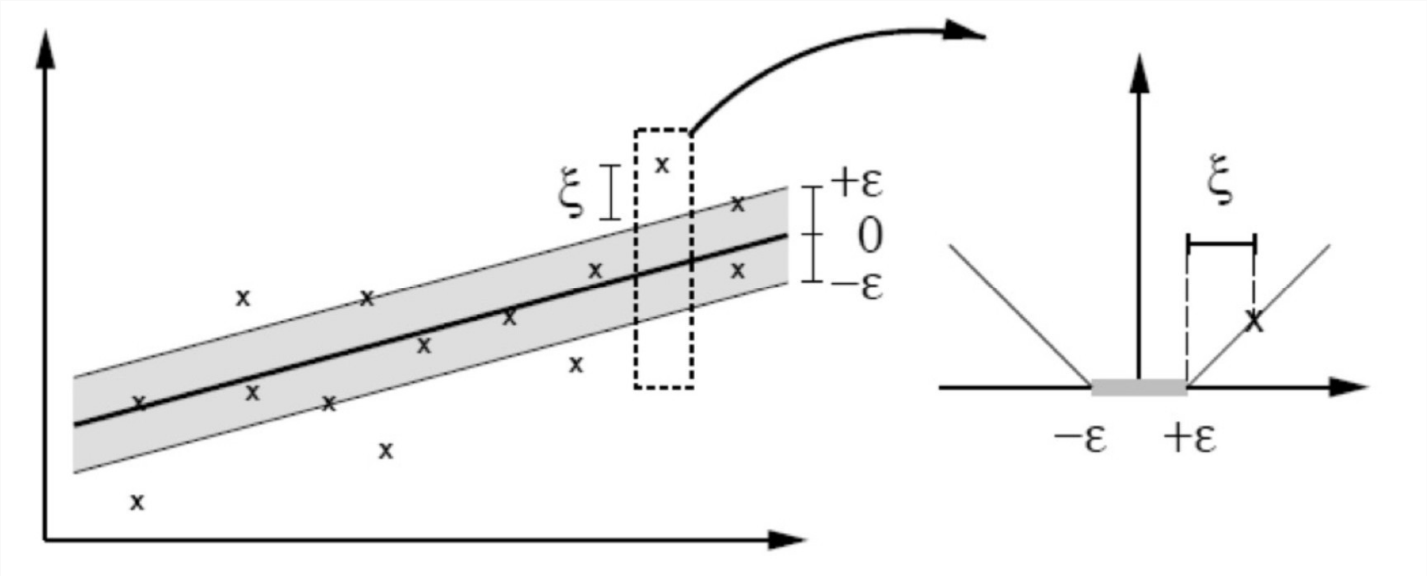
- El problema de aprendizaje de una SVM se formula como un problema de optimización convexa en donde hay algoritmos eficientes para encontrar el óptimo global.
- Otros métodos de clasificación como como los árboles de decisión y las redes neuronales tienden a encontrar óptimos locales.
- La SVM optimiza explícitamente la capacidad de generalización al maximizar el margen del límite de decisión.
- En una SVM el usuario debe ajustar hiper-parámetros, como el tipo de función de Kernel y el costo C para las variables de holgura (esto puede ser caro).
- La SVM puede aplicarse a los datos categóricos creando variables dummy binarias por cada categoría.
- La formulación de SVM presentada en esta clase se limita a problemas de clasificación binaria.

Outline : SVR

SVR: Principio

- Extendemos la idea del margen máximo a la regresión.
- Imponemos un ϵ-tubo: pérdida ϵ-sensible:

$$|\hat{y} - y|_\epsilon = max(0, |\hat{y} - y| - \epsilon)$$



SVR: Primal

SVR en el espacio primal

Sea C y ϵ:

$$\min_{b, \mathbf{W}, \xi} \frac{1}{2}||\mathbf{W}||^2 + \sum_i \xi_i + \xi^i$$

s.c.

$$Y_i - f(\mathbf{X}_i) \leq \epsilon + \xi_i$$

$$f(\mathbf{X}_i) - Y_i \leq \epsilon + \xi_i$$

$$\xi_i, \xi_i^* \geq 0$$

Donde $f_{\mathbf{W},b,\Phi} = \mathbf{W}^T\Phi(\mathbf{X}) + b$

SVR: Dual

SVR en el espacio dual

$$\alpha, \alpha_{\min} \sum_{i,j} (\alpha_i - \alpha_i^{\}} (\alpha_j - \alpha_j^{\}} k(\mathbf{X}_i, \mathbf{X}j)) + \epsilon \sum i(\alpha_i + \alpha_i^{\}} - \sum_i y_i(\alpha_i - \alpha_i^{\}}$$

s.c.

$$\sum_i (\alpha_i - \alpha_i^{\}} = 0$$

$$0 \geq \alpha_i \geq C$$

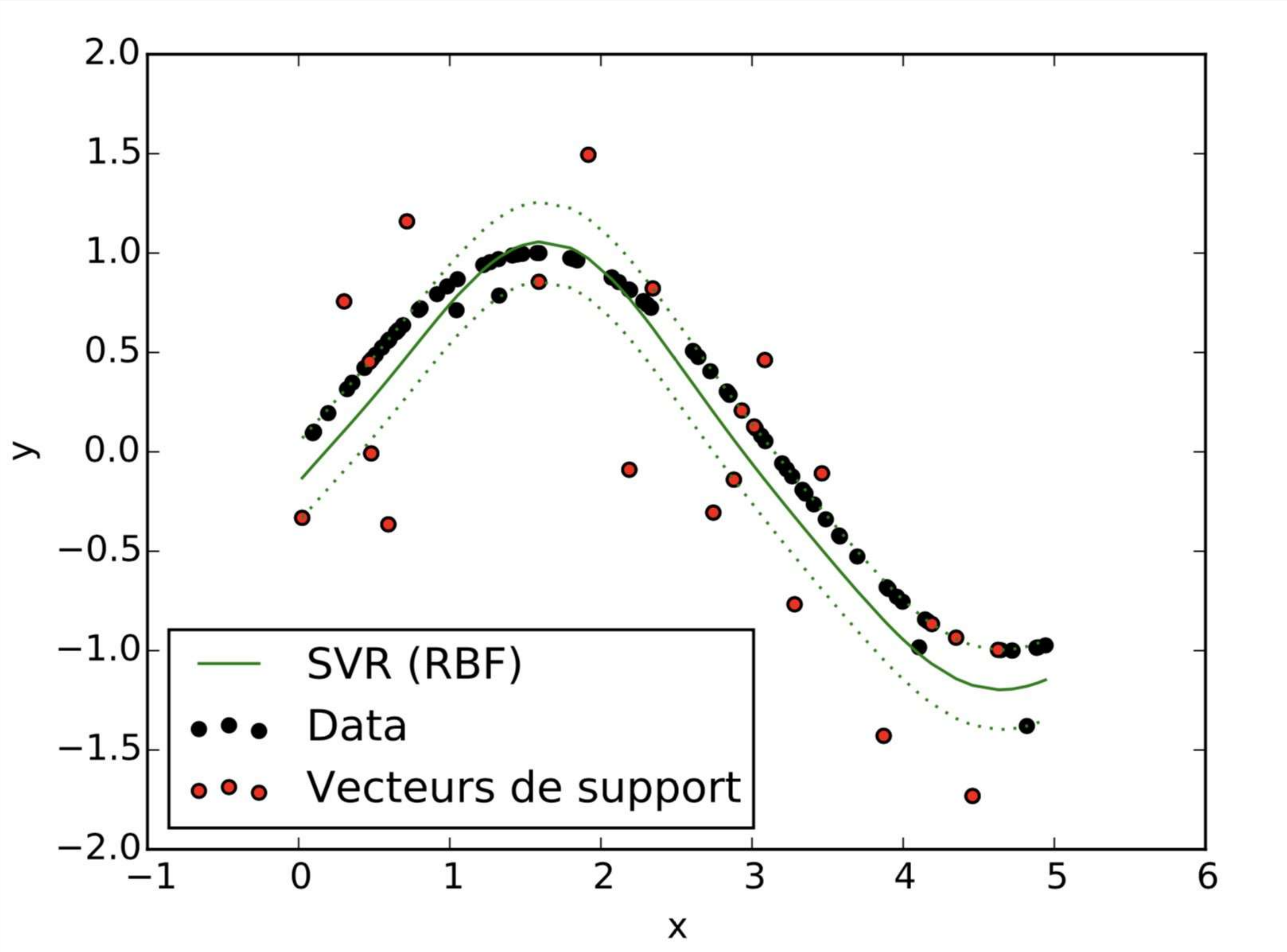
$$0 \geq \alpha_i^* \geq C$$

$\mathbf{W} = \sum_{i=1}^{n} (\alpha_i - \alpha_i^{\}} \Phi(\mathbf{X}i)$

Solución

$$f(\mathbf{X}) = \sum i = 1^n (\alpha_i - \alpha_i^{\}} k(\mathbf{X}_i, \mathbf{X}) + b$$

SVR: Ejemplo



SVR (RBF)
Data
Vecteurs de support
y
x
2.0
1.5
1.0
0.5
0.0
−0.5
−1.0
−1.5
−2.0
−1
0
1
2
3
4
5
6

Questions?

References i